

気泡塔におけるフィッシャー - トロプシュ合成について

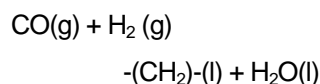
FLUENT のオイラー多相流モデル (EMM) は、工業的規模の気泡塔における反応系の流れ予測に利用することができる。反応する物質は気相であるが、その生成物は液相に含まれる。このことは、系内における質量の保存を維持するために、各相間の質量の移動を考慮しなければならないことを意味する。この強力な機能は、技術者が研究室規模の装置を拡大する場合に、規模の大きな流動の確実な理解を可能にする。

気泡塔は、化学工業分野で多方面で使用されており、その 1 つにフィッシャー - トロプシュ合成がある。この反応は、気体状の一酸化炭素と水素を各種の液体状炭化水素に変換するものである。その生成物は合成液体と呼ばれ、液体に転換される過程は合成ガス転換と呼ばれる。流体力学と化学反応は両方とも、既存の系において合成ガス転換の総量を決定するのに重要である。本例では、各相の化学種と相間の質量移動を伴うオイラー多相流モデルが、工業的規模の気泡塔における合成ガスの転換の予測に使用された。

オイラー多相流モデルでは、多流体または多相の混合を記述する全ての流体方程式を解く。これは、気相 - 液相混合における分離を予測する強力なツールであり、たとえば、沸騰のシミュレーションで起こる、各相間の質量の移動を含むことが可能である。反応は

各相内のみでも起こりうるが、本例では両方の相を含める。すなわち、反応の化学種はある相内にあるが、生成種は他相に存在する。このことを考慮するため、各相間の質量移動が系全体の質量保存を常時保証するために使用される。

本気泡塔は、2 次元軸対称モデルで記述される。その円筒の直径は 7m で、初期の液面の高さは 30m である。その反応は、2 つの気相反応物質、すなわち、低部注入口から注入される一酸化炭素(CO(g))と水素(H₂(g))間で起こる。その反応生成物は液体であり、H₂O(l) と、各種のメチレン系炭化水素 -(CH₂)-(l) である。



反応速度は、気相 - 液相界面の質量移動によって支配されるものと仮定

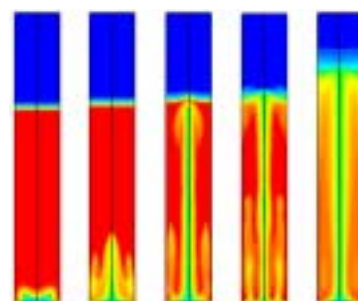


図 1: 液体体積分率分布, 5, 10, 15, 20, 60 秒時点

する。したがって、液相に関する移動係数と気相 - 液相界面の面積に依存する。また、各化学種の局所的な濃度の平衡値からの変動にも依存する。これらの情報を使用して、各反応種ごとの反応速度が計算され、そのうちの最も小さい(遅い)ものが計算で使用される。

CFD モデルは、2 つの気相化学種と 2 つの液相化学種を用いるが、床部には、最初、純水を充たし、上部の気体部分には純水素(H₂)を充たす。円筒の直径よりわずかに小さい直径の円筒底

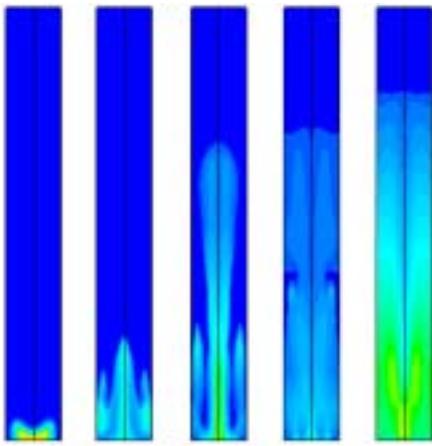


図2: 生成炭化水素分布
5, 10, 15, 20, 60 秒時点

部のガス注入口へ CO(87.5%)と H₂(12.5%)の混合ガスを、0.15m/s の割合で注入する。その化学反応は、気相 - 液相界面の質量移動に基づき、各相ごとに化学種が平衡であるものとして考慮される。

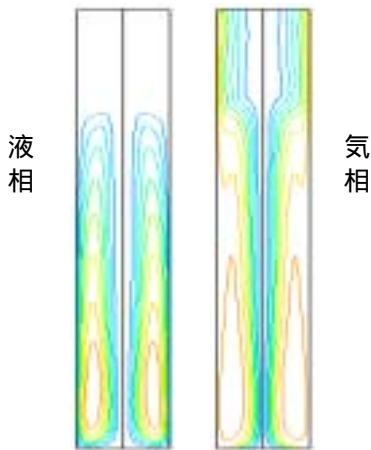


図3: 液相および気相の流れ

図1は、動作後5, 10, 15, 20, 60秒の液相体積分率を示している。赤は純粋な液体を、青はガスを示している。気相は経過時間とともに液体を充たし、

液面上昇を引き起こす。注入速度プロファイルは一定であるが、5秒後に液体中で変形し始め、動作中は継続する。60秒後には、流れパターンに変動はあるにしても、システムは定常状態に達する。

液体の成分は最初純水であるが、その後は変化して炭化水素生成物を含むようになる。これを図2に5, 10, 15, 20, 60秒後のメチレン系炭化水素(液相内の生成物の1つ)の質量分率として示す。

図2における円筒底部付近の生成物の増加は、図1に示されるような、円筒中央部で上昇するガス流に伴って発生した循環流によるものである。動作60秒後の流れパターンを、液相と気相の両方について図3に示す。液相の流れ場の特徴は強力な循環である。一方、気相には循環と、注入口から円筒上部排出口への流れが存在する。反応容器内でのガスと液体の循環が反応を連続させ、下部付近における高い生成物の濃度を維持する様子を図2に示す。

図4は、ガスホールドアップまたはガス体積分率を示し、ガス空塔速度の関数としての合成ガスの転換量を示す。低ガス流量の場合には、ガスの運動量が小さいため、ガスは効率よく液体を上昇させ、満たすことができない。このような状態では、ガスホールドアップは低い。一方、高ガス流量の場合には、大きなガス運動量により液体を上昇さ

せることができ、ホールドアップも高くなる。この期待される流体力学的な結果は、CFDモデルで良好に予測し得る。ユニット内の滞留時間は低ガス流量の場合長いので、ガスから液体への転換量は多くなる。高ガス流量の場合、ガスの滞留時間は短くなり、転換量は減少する。このような傾向も、モデルによって予測し得る。図1と2の結果は、最も低い流量0.15m/sの場合に相当する。

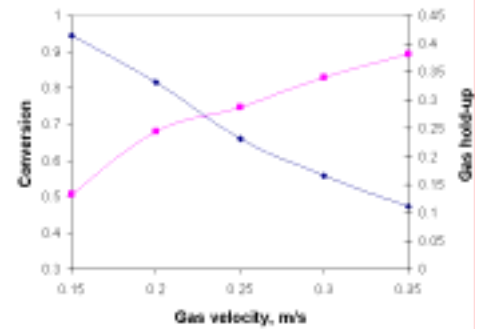


図4: ガス空塔速度の関数としての転換およびガスホールドアップ

要約すれば、この資料は反応多相流をモデル化する FLUENT の能力を示すものである。問題定義は、反応種が1つの相にあり、生成物は他の相にあるということから、より複雑になっている。これは、各相間の質量移動のモデリングを必要とするということである。結果は、このソフトウェアがこのタイプの複雑なシミュレーションに適していることを示唆している。